



## EDITAL PARA A ATRIBUIÇÃO DE BOLSAS NO ÂMBITO DE PROJETOS E INSTITUIÇÕES DE I&D

### 1 Bolsa de Investigação (BI) para Estudante de Doutoramento

Na FCIÊNCIAS.ID – Associação para a Investigação e Desenvolvimento de Ciências, encontra-se aberto concurso para a atribuição de 1 Bolsa(s) de Investigação (BI) no âmbito do projeto/instituição de I&D “INSILNANOBIOSOL - Nanobiosoluções in silico: Conceção computacional de complexos metálicos y Polioxometalatos bioativos para aplicações médicas / Instituto de Biosistemas e Ciências Integrativas (BioISI)”, “PTDC/QUI-QFI/29236/2017”, financiado por fundos nacionais através da FCT/MCTES (PIDDAC) no âmbito do programa Programa em Todos os Domínios Científicos, nas seguintes condições:

1. **Área Científica:** Química
2. **Requisitos de admissão:** Mestrado em Química com experiência em Química Computacional e Modelagem Molecular aplicados às interações de complexos metálicos com ADN.
3. **Fatores preferenciais:** Experiência nas seguintes técnicas computacionais: Linear-Scaling Density Functional Theory com SIESTA, uso de métodos semi-empíricos com MOPAC, cálculos QM/MM com Gaussian, uso da ferramenta de Análise da descomposição da energia com o ADF, experiência em cálculos QTAIM e uso de software para docking.
4. **Requisitos de contratualização:** Apresentação dos certificados de habilitações e/ou diplomas. Inscrição em Programa Doutoral Interuniversitário em Química Teórica e Modelagem Molecular.
5. **Plano de trabalhos:** A interação não covalente por meio de interações fracas de ligandos isolados ou incluídos em complexos metálicos com o ADN é um processo crucial no estudo de terapias alternativas contra o cancro além do estudo de processos inovadores contra a resistência bacteriana. No caso do ADN duplex se tem informação na bibliografia dum equilíbrio cinético onde há uma competição entre a interação pelo sulco e a intercalação e que este equilíbrio pode se modular por meio de substituições nos ligandos além de trocar o metal do complexo metálico e por tanto a sua natureza. Por outro lado, no caso das estruturas de G-quadruplexes existem também diferentes pontos de interação (end-stacking, intercalação, interação no sulco, interação com os loops, etc.) que também podem ser moduladas por meio de substituições nos ligandos e mudança do centro metálico. Uma vez foi estudada a interação do complexo metálico [Mo(phen)(C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)Br(CO)<sub>2</sub>(phen)] com o duplex de ADN e os G-quadruplexes, se pretende olhar como é que a substituição na phen, nos outros ligandos ou mesmo a mudança do centro metálico modula este tipo de interações com o ADN regular e com os G-quadruplexes. Portanto, o plano de trabalhos e investigação nesta bolsa visa à compreensão e racionalização de como substituições em diferente número e posição da phenanthrolina com grupos funcionais como -CH<sub>3</sub>, -NH<sub>2</sub>, -OH, =O, -Ph, -Cl, -COOH além de substituições nos outros ligandos e mudanças no centro metálico modulam a interação dos complexos metálicos objeto de estudo com o ADN não só regular mas também como os G-quadruplexes e portanto consegue se a seletividade por uma estrutura ou outra de ADN na interação. Para atingir este objetivo, o bolsista terá que desenvolver as seguintes tarefas:
  1. Cálculos docking para as diferentes situações objeto de estudo em que o complexo [Mo(phen)(C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>)Br(CO)<sub>2</sub>(phen)] vai interagir com o ADN regular e na forma de G-quadruplexe uma vez se fazem as diferentes substituições na phen e nos outros ligandos.
  2. Otimizações a um nível semi-empírico ou a um nível LS-DFT dos resultados mais representativos dos estudos Docking.
  3. EDA's dos sistemas otimizados mais representativos.
  4. Cálculos QTAIM e NCI para os mesmos sistemas em que se têm feitas as EDA's para saber a origem da natureza das interações fracas.

## EDITAL PARA A ATRIBUIÇÃO DE BOLSAS NO ÂMBITO DE PROJETOS E INSTITUIÇÕES DE I&D

6. **Legislação e regulamentação aplicável:** Estatuto do Bolseiro de Investigação Científica, aprovado pela Lei nº 40/2004, de 18 de agosto, na sua redação em vigor; Regulamento de Bolsas de Investigação da FCT, I. P., em vigor (Reg. 950/2019 publicado no DR em 16 de dezembro: <https://dre.pt/application/file/a/127230968>, ou no site da FCT: <https://www.fct.pt/apoios/bolsas/regulamento.phtml>) e do Regulamento de Bolsas de Investigação Científica da FCiências.ID aprovado em 12 de maio de 2020 ([Regulamento de Bolsas de Investigação Científica da FCiências.ID](#)).
7. **Local de trabalho:** O trabalho será desenvolvido no BioISI do(a) Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, sob a orientação científica do(a) Professor(a)/Doutor(a) Adrià Gil Mestres e Doutor Ángel Sánchez González.
8. **Duração da(s) bolsa(s):** A bolsa terá a duração inicial de 3 meses, com início previsto em março de 2022. O contrato de bolsa poderá ser eventualmente renovado até ao fim do projeto, de acordo com o estipulado no Regulamento de Bolsas de Investigação da Fundação para a Ciência e a Tecnologia, I.P.
9. **Valor do subsídio de manutenção mensal:** O montante da bolsa corresponde a € 1104,64, conforme [tabela de valores](#) das bolsas atribuídas diretamente pela FCT, I.P. no País.  
Os Bolseiros usufruirão de um seguro de acidentes pessoais e, caso não se encontrem abrangidos por qualquer regime de proteção social, podem assegurar o exercício do direito à segurança social mediante adesão ao regime do seguro social voluntário, nos termos previstos no Código dos Regimes Contributivos do Sistema Previdencial de Segurança Social.  
O valor da bolsa será pago mensalmente por transferência bancária.
10. **Métodos de seleção e respetiva valoração:** Os métodos de seleção a utilizar serão os seguintes: Curriculum Vitae (70%), carta de motivação (30%).
11. **Composição do Júri de Seleção:** Presidente do Júri: Doutor Adrià Gil Mestres; Vogais: Doutor Ángel Sánchez González e Doutor Paulo Nuno Martinho; Suplente: Doutor Nuno Bandeira.
12. **Forma de publicação/notificação dos resultados:** todos os candidatos deverão ser notificados, por email enviado pelo requerente do concurso, com o envio da ata da reunião de seleção.
13. **Prazo de candidatura:** O concurso encontra-se aberto no período de 31 de janeiro de 2022 a 14 de fevereiro de 2022.
14. **Forma de apresentação das candidaturas:** As candidaturas podem ser formalizadas, através de correio eletrónico para [agmestres@fc.ul.pt](mailto:agmestres@fc.ul.pt) acompanhadas dos seguintes documentos:
- Curriculum Vitae – CV pode ser disponibilizado em PDF ou através do sistema [CIÊNCIAVITAE](#);
  - Certificado de habilitações;
  - Outros documentos comprovativos considerados relevantes.
15. **Prazos e procedimentos de reclamação e recurso:** Caso a decisão a tomar seja desfavorável à concessão da bolsa requerida, os candidatos têm um prazo de 10 dias úteis, após a data de divulgação dos resultados da avaliação, para se pronunciarem, querendo, em sede de audiência prévia, nos termos previstos no Código do Procedimento Administrativo.  
Da decisão final pode ser interposto recurso para o Conselho de Administração da FCiências.ID ([fciencias.id@fciencias-id.pt](mailto:fciencias.id@fciencias-id.pt)) no prazo de 15 dias úteis após a respetiva notificação.

## EDITAL PARA A ATRIBUIÇÃO DE BOLSAS NO ÂMBITO DE PROJETOS E INSTITUIÇÕES DE I&D

**NOTA 1:** Os documentos comprovativos da titularidade de graus académicos ou diplomas, ou de inscrição em grau académico ou diploma, podem ser dispensados em fase de candidatura, sendo substituídos por declaração de honra do candidato, sendo obrigatório a verificação dessa condição para contratualização da bolsa.

**NOTA 2:** Salientamos que os graus académicos obtidos em países estrangeiros necessitam de reconhecimento por uma Instituição Portuguesa de acordo com o [Decreto-lei nº. 66/2018](#), de 16 de agosto e a [Portaria nº. 33/2019](#), de 25 de janeiro. A apresentação do reconhecimento é mandatória para a assinatura do contrato. Mais informação poderá ser obtida em: <https://www.dges.gov.pt/pt/pagina/reconhecimento?plid=374>. Em condições normais, a não entrega do reconhecimento do grau, no prazo de três meses a partir da data da comunicação da aprovação em sede de avaliação científica, implica a não concessão de bolsa.